



TITLE:

22.TlH\_2PO\_4における相転移の  
X線的研究(東京理科大学大学院理  
学研究科物理学専攻,修士論文題目  
・ アブストラクト(1989年度))

AUTHOR(S):

松尾, 淳

---

CITATION:

松尾, 淳. 22.TlH\_2PO\_4における相転移のX線的研究(東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度)). 物性研究 1990, 54(6): 748-748

ISSUE DATE:

1990-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94176>

RIGHT:

## 22. $\text{TiH}_2\text{PO}_4$ における相転移のX線的研究

松 尾 淳

$\text{TiH}_2\text{PO}_4$  は  $84^\circ\text{C}$  および  $-43^\circ\text{C}$  で逐次相転移する。結晶の各相をそれぞれ I 相 (高温相)、II 相 (室温相)、III 相 (低温相) と名づけたとき I - II 相転移は強弾性相転移であると報告されている。<sup>1)</sup> II 相において本結晶は単斜晶系  $P2_1/a$  ( $C_{2h}$ )<sup>2)</sup> に属し、結晶構造の決定もなされているが、I 相での X 線的研究は全く報告されていない。

本研究は  $\text{TiH}_2\text{PO}_4$  における I - II 相転移の機構を分子構造的側面から明らかにする目的で、X 線回折法により I 相での空間群および結晶構造を決定した。その結果、I 相において本結晶の空間群を斜方晶系  $Pcan$  ( $D_{2h}$ )、格子定数は  $a=14.386(3)$ 、 $b=4.522(1)$ 、 $c=6.525(2)$  Å と決定した。また水素原子を除く各原子の座標および温度因子を、305個の独立な反射を用いて決定し、その最終的な R 因子として  $R=0.065$ 、 $wR=0.071$  を得た。この I - II 相転移にともなう空間群の変化を考察することにより、本相転移は  $D_{2h}$  のブリュアンゾーンの  $\Gamma$  点での既約表現  $B_{2g}$  に起因すると結論できる。また、I、II 各相における結晶構造を比較することにより、I - II 強弾性相転移に伴う原子の変位を微視的見地から考察した結果、 $\text{PO}_4$  分子が  $ac$  平面内で転移点を境として一齐に回転することが明らかとなった。さらに、現象論を用いて本相転移に伴う自発歪  $x_{5g}$  の振舞いを考察した。

1) H.Yoshida, M.Endo, T.Kaneko, T.Osaka and Y.Makita : J.Phys. Soc.Jpn. 53(1984)910.

2) R.J.Nelmes and R.N.P.Choudhary : Solid State Commun. 38(1981) 321.